(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum Internationales Büro



## | CAND | CANDO | CANDO

(43) Internationales Veröffentlichungsdatum
4. August 2005 (04.08.2005)

**PCT** 

## (10) Internationale Veröffentlichungsnummer WO 2005/070879 A1

(51) Internationale Patentklassifikation7: C07C 253/20, 253/22, 291/10, 255/50

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2005/000361

(22) Internationales Anmeldedatum:

15. Januar 2005 (15.01.2005)

(25) Einreichungssprache:

Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache:

Deutsch

(30) Angaben zur Priorität: 10 2004 003 953.4 26. Januar 2004 (26.01.2004) DE

- (71) Anmelder (für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme von US): CLARIANT GMBH [DE/DE]; Brüningstrasse 50, 65929 Frankfurt am Main (DE).
- (72) Erfinder; und
- (75) Erfinder/Anmelder (nur für US): MEUDT, Andreas [DE/DE]; Fischbacher Weg 4, 65719 Hofheim (DE). SCHERER, Stefan [DE/DE]; Wilhelm-Leuschner-Strasse

212, 64347 Griesheim (DE). NERDINGER, Sven [DE/DE]; Andresenstrasse 5, 82008 Unterhaching (DE).

- (74) Anwälte: HÜTTER, Klaus usw.; Clariant GmbH, Patente, Marken und Lizenzen, Am Unisys-Park 1, 65843 Sulzbach (DE).
- (81) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare nationale Schutzrechtsart): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.
- (84) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare regionale Schutzrechtsart): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK,

[Fortsetzung auf der nächsten Seite]

(54) Title: METHOD FOR PRODUCING NITRILES AND ISONITRILES BY USING DEHYDRATION REACTORS WITH PROPANEPHOSPHONIC ACID ANHYDRIDES

(54) Bezeichnung: VERFAHREN ZUR HERSTELLUNG VON NITRILEN UND ISONITRILEN DURCH DEHYDRATISIE-RUNGSREAKTIONEN MIT PROPANPHOSPHONSÄUREANHYDRIDEN

(III)

$$R - C \equiv N$$
 (II)  $R - N \equiv C$ 

(57) Abstract: The invention concerns a method for producing: a) nitriles of formula (II) and; b) isonitriles of formula (III) by reacting: a) carboxylic acid amides (RCO-NH2), ammonium salts of carboxylic acids (RCOO-NH4+) or carboxylic acids in the presence of ammonia or ammonium salts (RCOOH +NH3, RCOOH + NH4+) or, b) formamides (H-CO-NHR) or mixtures of amines with formic acid, with cyclic phosphonic acid anhydrides while eliminating water at a temperature ranging from -30 to +120 °C, in which R represents an arbitrarily substituted linear or branched C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub> alkyl

radical, a  $C_3$ - $C_{10}$  cycloalkyl radical, alkenyl radical, alkynyl radical or an aryl radical or heteroaryl radical. As a cyclic phosphonic acid anhydride, a 2,4,6,-substituted 1,3,5,2,4,6-trioxatriphosphinane-2,4,6-trioxide of formula (I) is used, in which: x = 3, 4 or 5; R', independent of one another, represents open-chain or branched, saturated or unsaturated, straight-chain  $C_1$  to  $C_{16}$  alkyl radicals or cyclic  $C_3$  to  $C_{16}$  alkyl radicals or aryl or heteroaryl.

(57) Zusammenfassung: Verfahren zur Herstellung von a) Nitrilen der Formel (II) und b) Isonitrilen der Formel (III) durch Umsetzung von a) Carbonsäureamiden (RCO-NH2), Ammoniumsalzen von Carbonsäuren (RCOO-NH4+) oder Carbonsäuren in Gegenwart von Ammoniak oder Ammoniumsalzen (RCOOH + NH3, RCOOH + NH4+) oder b) Formamiden (H-CO-NHR) oder Mischungen von Aminen mit Ameisensäure, mit cyclischen Phosphonsäureanhydriden unter Abspaltung von Wasser, bei einer Temperatur im Bereich von -30 bis +  $120^{\circ}$ C, wobei R für einen beliebig substituierten linearen oder verzweigten  $C_1$ - $C_8$ -Alkylrest, einen  $C_3$ - $C_{10}$ -Cycloalkyl-, Alkenyl-, Alkinyl- oder einen Aryl- oder Heteroarylrest steht. Als cyclisches Phosphonsäureanhydrid wird insbesondere ein 2,4,6-substituiertes 1,3,5,2,4,6-trioxatriphosphinan-2,4,6-trioxid der Formel (I), worin x = 3, 4 oder 5 ist und R' unabhängig voneinander für offenkettige oder verzweigte, gesättigte oder ungesättigte, geradkettige  $C_1$ , bis  $C_{16}$ -Alkylreste oder cyclische  $C_3$  bis  $C_{16}$ -Alkylreste oder für Aryl oder Heteroaryl steht, eingesetzt.





WO 2005/070879



EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN; TD, TG).

Veröffentlicht:

- mit internationalem Recherchenbericht
- vor Ablauf der f\(\text{tir}\) \(\text{Anderungen der Anspr\(\text{uche geltenden Frist}\); \(\text{Ver\(\text{offentlichung wird wiederholt}\), \(falls\) \(\text{Anderungen eintreffen}\)

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.